

## Конформационный поиск молекулярных кластеров $(\text{H}_2\text{SO}_4)_n(\text{NH}_3)_m$ с автоматическим генерированием исходных данных

Назаренко К.М., Коробов Н.А., Марков П.Н., Назаренко Е.С., Надыкто А.Б.

МГТУ «СТАНКИН» Россия, 127055, г. Москва, ул. Вадковский пер. 1;  
Тел.: (+7 499)972-95-00, E-mail: [cmr.nazy@gmail.com](mailto:cmr.nazy@gmail.com)

Для эффективного конформационного поиска необходим репрезентативный набор исходных геометрических конфигураций изучаемых молекулярных кластеров. Его подготовка вручную трудоемка, а ее результаты могут быть неполны и искажены из-за неверных субъективных предположений о форме наиболее стабильного изомера. Поэтому в данном исследовании применялись исключительно автоматически сгенерированные с использованием [1] исходные данные.

Нами производился конформационный поиск молекулярных кластеров  $(\text{H}_2\text{SO}_4)_n(\text{NH}_3)_m$ , где  $n = 1 \dots 4$ ,  $m = 0 \dots 4$  и  $(\text{H}_2\text{SO}_4)_n$  для  $n = 5 \dots 8$  с использованием предложенной в [2] трехуровневой схемы. Расчеты проводились на уровне теории PW91PW91/6-311++G(3df,3pd) в пакете Gaussian 09 [3].

В исследовании установлены и подтверждены вычислительными экспериментами

- параметры алгоритма автоматической генерации исходных данных: максимальные отклонения свободной энергии Гиббса от наиболее стабильного в классе для базовых структур (15 ккал/моль); шаг сетки (0.3 нм), количество вариантов поворота лигандов (4), допустимые расстояния их размещения от базовой структуры (от 0.26 до 0.5 нм);
- квантово-химические методы для предварительной оптимизации (PM6, PW91PW91/CBSB7) [3], пороговые значения отклонений энергии Гиббса от наиболее стабильного найденного изомера (15-18 ккал/моль и более), величины минимальных различий свободной энергии Гиббса (0.15 ккал/моль) и модуля дипольного момента (0.07 Д) отбора результатов PM6 для дальнейшей ТФП-оптимизации [2];

Предложен критерий останова расчетов с использованием диаграммы рассеивания отклонений энергии Гиббса от найденного минимального значения, повышающий производительность конформационного поиска;

Показана эффективность конформационного поиска с применением автоматически подготовленных исходных геометрических конфигураций молекулярных кластеров, найдены новые более стабильные изомеры  $(\text{H}_2\text{SO}_4)_n(\text{NH}_3)_m$  и  $(\text{H}_2\text{SO}_4)_n$ .

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках выполнения государственного задания FSFS-2024-0011.

### Литература

1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2024691433 от 09.12.2024г. «Программное средство синтеза начальных конфигураций молекулярных структур для конформационного поиска (Сеятель)», Назаренко К.М., и др.
2. Коробов Н. А. и др. Анализ технических условий проведения вычислительных экспериментов конформационного поиска // Сб. 5-ой МК МНПС – 2021. – С. 215-217.
3. <https://gaussian.com/>